

デジタルアニーラを用いた香料分子の類似度評価

Similarity evaluations of fragrance molecules using Digital Annealer

富士通研 寺島 千絵子, [○]實宝 秀幸, 大淵 真理Fujitsu Labs. Ltd., Chieko Terashima, [○]Hideyuki Jippo, and Mari OhfuchiE-mail: jippo.hideyuki@fujitsu.com

化学物質の探索では、構造の類似度に着目する方法がよく用いられる。構造の類似度が高い物質どうしは性質も類似すると期待されるためである。例えば、性質が既に明らかになっている物質を参照物質として、データベースに対して類似度評価を行うことで、同様の性質を持つ可能性のある物質を高速にスクリーニングすることができる。従来、分子の類似度評価には特定の部分構造に着目したフィンガープリント法が用いられるが、今回我々は2分子間の最大共通部分構造の探索を組合せ最適化問題[1]としてデジタルアニーラ[2]で解き、分子類似度の算出を行った。求めた類似度を用いて香料分子の評価対象群から目的の香りを持つ分子の抽出ができるかどうかの検証を行った。

本研究では、食品衛生法施行規則・別表第一に指定されている着香を目的とした食品添加物（食品香料化合物）のうち、化合物名で指定されている132分子を類似度評価の対象とした。またこれらの分子における香りはThe Good Scents Company Information System[3]が提供するデータベースの記述を用いた。評価対象群に含まれる132分子に対して、citrusの香りを持つリナロール(Fig. 1)を参照分子として算出した類似度上位10分子をTable 1に示す。リナロール以外にcitrusの香りを持つ10分子のうち8分子が含まれている。参照分子としてvanillaの香りを持つバニリン、balsamの香りを持つケイ皮酸を用いても、フィンガープリント法より同じ香りを持つ分子を多く抽出することができた。また、本手法ではフィンガープリント法と比較して、類似分子間の共通構造を見つけることが容易であることが分かった。本手法は、香りだけでなく、化学物質の様々な性質に対しても適用可能である。

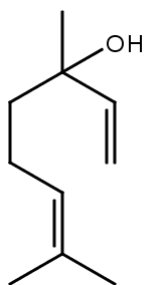


Fig. 1: Structural formula of Linalool.

Table 1: Top 10 molecules for similarity to Linalool.

Molecule	Odor	Similarity
Linalool (Query)	citrus floral sweet boise de rose woody green blueberry	1.00
Terpineol	pine terpene lilac citrus woody floral	0.82
Citronellal	clean herbal citrus	0.82
Geraniol	sweet floral fruity rose waxy citrus	0.82
Linalyl acetate	sweet green citrus bergamot lavender woody	0.81
1-Penten-3-ol	pungent horseradish green vegetable tropical fruity	0.77
Citronellyl formate	bergamot cucumber rose apricot peach plum	0.76
Citronellyl acetate	floral green rose fruity citrus woody tropical fruit	0.73
Terpinyl acetate	herbal bergamot lavender lime citrus	0.73
Citronellol	floral leather waxy rose bud citrus	0.73
Citral	citrus lemon	0.73

[1] M. Hernandez et al., arXiv:1601.06693. [2] 佐尾将隆ほか, FUJITSU, Vol. 69, No.4, 77-83 (2018).

[3] <http://www.thegoodscentscompany.com/index.html>